

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВА $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$

Андреев С.Н.^{1*}, Кашин И.В.¹, Бадртдинов Д.И.¹, Мазуренко В.В.¹

1) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.

*E-mail: s.n.andreev@urfu.ru

THE STUDY OF THE ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ ALLOYS

Andreev S.N.^{1*}, Kashin I.V.¹, Badrtdinov D.I.¹, Mazurenko V.V.¹

1) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is devoted to the investigation of electronic and magnetic properties of $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ alloys. In order to solve this problem the first-principles calculations were used. Having calculated an equilibrium atomic structure, we analyze the electronic excitation spectrum and values of various magnetic moments.

Спинтроника сегодня является одним из наиболее бурно развивающихся направлений экспериментальной и теоретической физики в силу огромного потенциала технологического применения в вычислительных узлах, модулях памяти. Базой для таких устройств обычно используются переходные металлы, проявляющие уникальные особенности с фундаментальной и прикладной точек зрения. К одному из таких особенностей можно отнести явление магнитострикции. Это явление ярко проявляется в сплавах железа с примесями. В частности, при некоторых концентрациях примеси галлия возможно увеличение коэффициента магнитострикции в несколько раз [1].

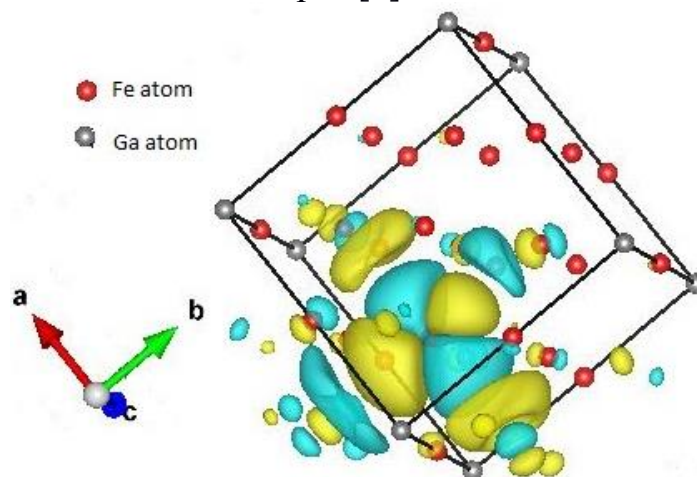


Рис. 1. dx^2-dy^2 орбиталь атома железа, одна из рассматриваемых базисных орбиталей в сплаве $\text{Fe}_{0.9375}\text{Ga}_{0.0625}$

Целью этой работы является описание магнитных свойств $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ при концентрациях примеси $x=0.25$ и 0.0625 . При помощи первопринципных методов

расчета были определены равновесные атомные позиции данных сплавов. Значения магнитных моментов приходящихся на каждый атом железа, и вид электронных плотностей состояний находятся в хорошем согласии с результатами предыдущих работ [2,3]. Оценка величины магнитострикции в данной работы обеспечивается построением реалистичной магнитной модели в базисе функций Ванье и оценкой наблюдаемых параметров с применением формализма одночастичных функций Грина. Это даст возможность детализировать микроскопические механизмы, ведущие к возникновению явления магнитострикции в данном соединении.

1. Wang H., Zhang Y.N., Yoon, et al., Scientific Reports 3, 3521 (2013)
2. Cao J.X., Zhang Y.N., et al., Phys. Rev. B. 80,104414. 5, 57 (2009)
3. Wu R, Journal of Applied Physics 91,7358 (2002)

ВЛИЯНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ НА ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЕЛАКСОРНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Аникин В.А. *, Шихова В.А., Ушаков А.Д., Федоровых В.В., Есин А.А.,
Холкин А.Л., Шур В.Я.

Институт Естественных Наук и Математики, Уральский федеральный университет,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: anikin_30@mail.ru

INFLUENCE OF THE DOMAIN STRUCTURE ON PIEZOELECTRIC AND DIELECTRIC PROPERTIES OF RELAXOR FERROELECTRICS

Anikin V.A. *, Shikhova V.A., Ushakov A.D., Fedorovych V.V., Esin A.A.,
Kholkin A.L., Shur V.Ya.

School of Natural Sciences and Mathematics, Ural Federal University,
Yekaterinburg, Russia

We have studied influence of the initial domain structure on piezoelectric and dielectric properties of relaxor ferroelectrics: SBN single crystals and PLZT ceramics. The initial domain structure was created by: (1) zero-field cooling, (2) in-field cooling, (3) partial switching. The difference of the frequency dependences of integral piezoelectric response and temperature dependences of dielectric permittivity for various initial domain structures was revealed.

Было изучено влияние исходной доменной структуры на пьезоэлектрические и диэлектрические свойства монокристаллов ниобата бария-стронция ($\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$, легированного Се и Ni) и керамики цирконата-титаната свинца, легированного лантаном $\text{Pb}_{0.92}\text{La}_{0.08}(\text{Zr}_{0.65}\text{Ti}_{0.35})_{0.98}\text{O}_3$ (PLZT8/65/35).